УДК 530.1

А. А. Зайцев, Д. А. Каргаполов

ИНТЕГРИРУЕМЫЙ СЛУЧАЙ МАТРИЧНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ МНОГОУРОВНЕВЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Получены точные решения матричного уравнения Шредингера для многоуровневых квантовых систем и выполнен расчет основных инвариантов. Установлено, что характеристическое уравнение во всех случаях имеет только два корня, из которых один простой, а второй кратный.

Explicit solutions of the Schrödinger matrix equation are received and performed the calculations of the main invariants. It is established that the characteristic equation in all cases has only 2 roots, one is a simple and second is multiple.

Ключевые слова: матричное уравнение Шредингера, многоуровневая квантовая система, точное решение, инвариант, характеристическое уравнение.

Key words: Schrödinger equation, multilevel quantum system, exact solution, invariant, characteristic equation.

Введение

К настоящему моменту времени получено много решений матричного уравнения Шредингера для двухуровневой квантовой системы. Они применяются, в частности, для нахождения многосолитонных решений нелинейного уравнения Шредингера. Один способ получения этих решений предложен нами в статьях [1; 2]. Однако для случая многоуровневой системы, по-видимому, до сих пор не найдено ни одного точного решения, если не считать простого случая постоянного гамильтониана. Цель данной статьи — получить такое решение. Мы используем метод, близкий к методам работ [1—3].

Постановка задачи

Рассматривается матричное уравнение Шредингера следующего вида:

$$i\dot{\psi} = H\psi\ ,\ \ H = JE + V\ , \tag{1}$$

где $J = diag(c_1, c_2,..., c_n)$, $c_1 > c_2 > ... > c_n$, $V = V(t)$ — эрмитова матрица, $V^+ = V$,

$$diag V = 0\ , \tag{2}$$

E — произвольный вещественный параметр. Требуется найти матрицы V и $S = S(t)$ такие, что матричная функция

$$\psi = (IE + S(t))\exp(-iJEt) \tag{3}$$

будет решением уравнения (1) (здесь I обозначает единичную матрицу). Мотивом использования представления (3) является то, что в простейшем случае $V = 0$ решение уравнения (1) имеет вид $\psi = \exp(-iJEt)$, поэтому естественным обобщением этого решения будет выражение (3).

Утверждение 1. Для решения вида (3) скаляр $\det(IE + S)$ и матрицы $S + S^+$, S^+S принимают постоянные значения, причем обе матрицы диагональные.

Доказательство. Воспользуемся следующим свойством любых матричных решений уравнения (1), которое отмечено в статье [1]: величины $\exp(iEt\mathrm{tr}J)\det\psi$ и $\psi^+\psi$ являются постоянными скаляром и матрицей. Тогда в силу диагональности матрицы J будем иметь

$$\det(IE + S) = \det\psi\det\exp(iJEt) = \exp(iEt\ \mathrm{tr}\ J)\det\psi = const\ .$$

Далее,

$$\psi^+\psi = \exp(iJEt)R\exp(-iJEt)\ , \tag{4}$$

где

$$R = (IE + S^+)(IE + S) = IE^2 + (S + S^+)E + S^+S\ . \tag{5}$$

Обозначим элементы матриц $\psi^+\psi$ и R символами Ψ_{jk} и R_{jk} соответственно, тогда соотношение (4) в покомпонентной форме будет таким:

$$\Psi_{jk} = \exp\left(i\left(c_k - c_j\right)Et\right)\mathrm{R}_{jk} .$$

В силу постоянства матрицы Ψ отсюда следует, что матрица R является *постоянной диагональной матрицей*. В свою очередь, из этого свойства и равенства (5) следует, что $S+S^+$ и S^+S будут постоянными диагональными матрицами. Утверждение доказано.

Вывод основной системы уравнений

После подстановки выражения (3) в уравнение (1) и необходимых упрощений получаем для матричных функций $V(t)$ и $S(t)$ следующую систему уравнений:

$$V = \left[S, J\right], \tag{6}$$

$$i\dot{S} = VS . \tag{7}$$

Обозначим элементы матриц V и S символами v_{jk} и s_{jk}. Поскольку соответствующий элемент коммутатора $[S, J]$ равен $(c_k - c_j)s_{jk}$, то уравнение (6) сводится к соотношениям

$$v_{jk} = -\left(c_j - c_k\right)s_{jk} , \tag{8}$$

причем условие (2) (условие нулевой диагонали матрицы V) автоматически выполняется. Из соотношения (8) и условия эрмитовости матрицы V следуют равенства:

$$s_{jk} = -\bar{s}_{kj} . \tag{9}$$

Записывая уравнение (7) в покомпонентном виде с учетом соотношений (8), получаем такую систему уравнений

$$i\dot{s}_{jk} = \sum_l \left(c_l - c_j\right)s_{jl}s_{lk} . \tag{10}$$

Эта система, дополненная соотношениями (9), будет основным объектом дальнейшего исследования, которое начнем с рассмотрения двух простейших случаев: двухуровневой и трехуровневой систем.

Случай двухуровневой системы

В этом случае система (10) с учетом соотношений (9) сводится к уравнениям

$$i\dot{s}_{11} = \left(c_1 - c_2\right)\left|s_{12}\right|^2 , \; i\dot{s}_{12} = -\left(c_1 - c_2\right)\bar{s}_{11}s_{12} , \; s_{21} = -\bar{s}_{12} , \; s_{22} = \bar{s}_{11} . \tag{11}$$

Из первого уравнения этой системы следует, что $\mathrm{Re}s_{11} = const$. По этой причине полагаем

$$s_{11} = \frac{\omega}{c_1 - c_2} + is , \; s_{12} = r\exp\left(i\theta\right). \tag{12}$$

Тогда первые два уравнения системы (11) принимают вид

$$\dot{s} = -\left(c_1 - c_2\right)r^2 , \; i\frac{\dot{r}}{r} - \dot{\theta} = \omega + i\left(c_1 - c_2\right)r .$$

Они интегрируются методами теории динамических систем [4]; результатом будут равенства

$$s = -\frac{b}{c_1 - c_2}\,\mathrm{th}\left(b\left(t - t_0\right)\right), \; r = \frac{b}{\left(c_1 - c_2\right)\mathrm{ch}\left(b\left(t - t_0\right)\right)} , \; \theta = \omega t + \theta_0 .$$

Далее из формул (12) и двух последних равенств системы (11) находим элементы матриц S и V:

$$\begin{gathered} s_{11} = \frac{1}{c_1 - c_2}\left(\omega - ib\,\mathrm{th}\left(b\left(t - t_0\right)\right)\right), \; s_{12} = \frac{b\exp\left(i\left(\omega t + \theta_0\right)\right)}{\left(c_1 - c_2\right)\mathrm{ch}\left(b\left(t - t_0\right)\right)} , \\ s_{21} = -\frac{b\exp\left(-i\left(\omega t + \theta_0\right)\right)}{\left(c_1 - c_2\right)\mathrm{ch}\left(b\left(t - t_0\right)\right)} , \; s_{22} = \frac{1}{c_1 - c_2}\left(\omega + ib\,\mathrm{th}\left(b\left(t - t_0\right)\right)\right); \\ v_{12} = -\frac{b\exp\left(i\left(\omega t + \theta_0\right)\right)}{\mathrm{ch}\left(b\left(t - t_0\right)\right)} , \; v_{21} = -\frac{b\exp\left(-i\left(\omega t + \theta_0\right)\right)}{\mathrm{ch}\left(b\left(t - t_0\right)\right)} . \end{gathered} \tag{13}$$

С помощью этих равенств несложно выполнить расчет всех трех инвариантов из утверждения 1; результат расчета следующий:

$$\det(IE+S)=D(E)\,,\ S+S^{+}=2\left(E+\frac{\omega}{c_1-c_2}\right)I\,,\ S^{+}S=D(E)I\,,$$

$$D(E)=\left(E+\frac{\omega}{c_1-c_2}\right)^2+\frac{b^2}{(c_1-c_2)^2}\,.$$

В заключение анализа двухуровневой системы заметим, что в случае $\omega=0$ выражения для элементов матричной функции $S(t)$ можно записать в виде:

$$s_{11}=-id\,\frac{E_1-E_2}{E_1+E_2}\,,\ s_{12}=2d\,\frac{\sqrt{E_1E_2}\,\exp(i\theta_0)}{E_1+E_2}\,,$$

$$s_{21}=-2d\,\frac{\sqrt{E_1E_2}\,\exp(-i\theta_0)}{E_1+E_2}\,,$$

$$s_{22}=id\,\frac{E_1-E_2}{E_1+E_2}\,,\ E_k=a_k\exp(2c_kdt)\,,\ k=1{,}2\,,\ d=\frac{b}{c_1-c_2}\,. \tag{14}$$

Именно эти выражения будут обобщены на случай многоуровневых систем.

Случай трехуровневой системы

Ограничимся случаем, когда

$$S=iB\,, \tag{15}$$

где B — эрмитова матрица, удовлетворяющая соотношению

$$B^2=d^2I\,,\ d>0\,.$$

Тогда для элементов матрицы справедливы равенства

$$b_{11}^2+|b_{12}|^2+|b_{13}|^2=d^2\,,\ |b_{12}|^2+b_{22}^2+|b_{23}|^2=d^2\,,$$

$$|b_{13}|^2+|b_{23}|^2+b_{33}^2=d^2\,. \tag{16}$$

Система (10) с учетом соотношений (9) и (16) сводится к уравнениям

$$\dot b_{11}=c_1\left(b_{11}^2-d^2\right)+c_2|b_{12}|^2+c_3|b_{13}|^2\,,\ \dot b_{22}=c_1|b_{12}|^2+c_2\left(b_{22}^2-d^2\right)+c_3|b_{23}|^2\,,$$

$$\dot b_{33}=c_1|b_{13}|^2+c_2|b_{23}|^2+c_3\left(b_{33}^2-d^2\right); \tag{17}$$

$$\dot b_{12}=c_1b_{11}b_{12}+c_2b_{12}b_{22}+c_3b_{13}\bar b_{23}\,,\ \dot b_{13}=c_1b_{11}b_{13}+c_2b_{12}b_{23}+c_3b_{13}b_{33},$$

$$\dot b_{23}=c_1\bar b_{12}b_{13}+c_2b_{22}b_{23}+c_3b_{23}b_{33}\,; \tag{18}$$

$$b_{12}\bar b_{13}=-(b_{22}+b_{33})\bar b_{23}\,,\ b_{12}b_{23}=-(b_{11}+b_{33})b_{13}\,,$$

$$b_{13}\bar b_{23}=-(b_{11}+b_{22})b_{12}\,. \tag{19}$$

Следствием соотношений (19) и вещественности элементов b_{jj}, $j=1, 2, 3$, будут равенства

$$b_{12}\bar b_{13}b_{23}=\bar b_{12}b_{13}\bar b_{23}=-(b_{11}+b_{22})(b_{11}+b_{33})(b_{22}+b_{33})\,.$$

С их помощью из соотношений (19) находим

$$|b_{12}|^2=(b_{11}+b_{33})(b_{22}+b_{33})\,,\ |b_{13}|^2=(b_{11}+b_{22})(b_{22}+b_{33})\,,$$

$$|b_{23}|^2=(b_{11}+b_{22})(b_{11}+b_{33})\,. \tag{20}$$

Благодаря этим формулам система (17) упрощается и принимает вид

$$\dot b_{11}=c_1\left(b_{11}^2-d^2\right)+c_2(b_{11}+b_{33})(b_{22}+b_{33})+c_3(b_{11}+b_{22})(b_{22}+b_{33})\,,$$

$$\dot{b}_{22} = c_1(b_{11}+b_{33})(b_{22}+b_{33}) + c_2\left(b_{22}^2 - d^2\right) + c_3(b_{11}+b_{22})(b_{11}+b_{33}),$$

$$\dot{b}_{33} = c_1(b_{11}+b_{22})(b_{22}+b_{33}) + c_2(b_{11}+b_{22})(b_{11}+b_{33}) + c_3\left(b_{33}^2 - d^2\right). \qquad (21)$$

Подстановка выражений (20) в равенства (17) дает одно соотношение

$$b_{11} + b_{22} + b_{33} = d\ . \qquad (22)$$

С его помощью из системы (21) получаем еще более простую систему уравнений для элементов b_{11}, b_{22}:

$$\dot{b}_{11} = (c_1 - c_3)b_{11}^2 + (c_2 - c_3)b_{11}b_{22} - (c_2 - c_3)d(b_{11}+b_{22}) - (c_1 - c_2)d^2,$$

$$\dot{b}_{22} = (c_1 - c_3)b_{11}b_{22} + (c_2 - c_3)b_{22}^2 - (c_1 - c_3)d(b_{11}+b_{22}) + (c_1 - c_2)d^2. \qquad (23)$$

Непосредственное интегрирование этой системы вызывает трудности, поэтому проанализируем ее методами теории динамических систем и построим фазовый портрет (рис.).

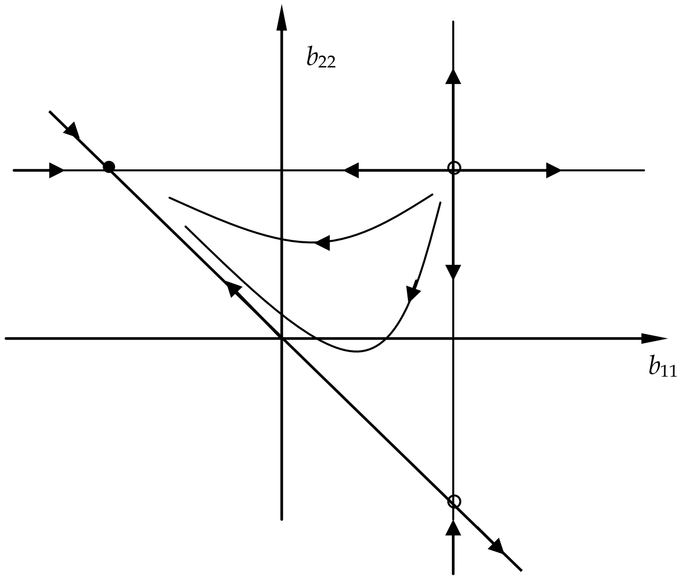

Рис. Фазовый портрет динамической системы (23);
темный кружок — аттрактор, светлые кружки — репеллер и седловая точка.
Стрелочки показывают направление движения

Сначала найдем критические точки. Для этого приравняем правые части 0 и решим алгебраические уравнения. Решение дает три критические точки

$$(b_{11}, b_{22}) = (d, d), (-d, d), (d, -d).$$

Из них первая будет репеллером типа неустойчивый узел, вторая — аттрактором типа устойчивый узел, третья — седловой точкой. Несложно проверить, что все прямые, проходящие через каждую пару критических точек, являются траекториями динамической системы (23). Решения, соответствующие этим траекториям, будут такими

$$b_{11} = -d\ \mathrm{th}\big((c_1 - c_3)d(t - t_0)\big),\ b_{22} = d\ ,$$

$$b_{11} = -d\ \mathrm{th}\big((c_1 - c_2)d(t - t_0)\big),\ b_{22} = d\ \mathrm{th}\big((c_1 - c_2)d(t - t_0)\big),$$

$$b_{11} = d\ ,\ b_{22} = -d\ \mathrm{th}\big((c_2 - c_3)d(t - t_0)\big).$$

Поскольку они имеют сходство с решениями (13), полученными при анализе двухуровневой системы, то их можно привести к виду, аналогичному (14). Дополняя выражениями для элемента b_{33}, которые получаются с помощью соотношения (22), получаем

$$b_{11} = -d\,\frac{E_1 - E_3}{E_1 + E_3},\ b_{22} = d\ ,\ b_{33} = d\,\frac{E_1 - E_3}{E_1 + E_3},$$

$$b_{11} = -d\,\frac{E_1 - E_2}{E_1 + E_2},\ b_{22} = d\,\frac{E_1 - E_2}{E_1 + E_2},\ b_{33} = d\ ,$$

$$b_{11} = d\,,\; b_{22} = -d\,\frac{E_2 - E_3}{E_2 + E_3}\,,\; b_{33} = d\,\frac{E_2 - E_3}{E_2 + E_3}\,,$$

$$E_k = a_k \exp(2c_k dt)\,,\; k = 1,2,3\,.$$

Эти выражения подсказывают, что общее решение системы (21) должно выражаться формулами

$$b_{11} = d(-E_1 + E_2 + E_3)/\,E_0\,,\; b_{22} = d(E_1 - E_2 + E_3)/\,E_0\,,$$

$$b_{33} = d(E_1 + E_2 - E_3)/\,E_0\,, \qquad (24)$$

где $E_0 = E_1 + E_2 + E_3$.

Прямая подстановка формул (24) в систему (21) показывает, что эта система превращается в тождество, то есть формулы (24) действительно дают решение системы (21).

Остальные элементы матричной функции $B(t)$ находятся из системы (19), которая благодаря формулам (24) превращается в простую алгебраическую систему. Ее решение дает выражения

$$b_{12} = -2d\,\exp(i(\beta_1 - \beta_2))\sqrt{E_1E_2}\,/\,E_0\,,\; b_{21} = -2d\,\exp(i(\beta_2 - \beta_1))\sqrt{E_2E_1}\,/\,E_0\,,$$

$$b_{13} = -2d\,\exp(i(\beta_1 - \beta_3))\sqrt{E_1E_3}\,/\,E_0\,,\; b_{31} = -2d\,\exp(i(\beta_3 - \beta_1))\sqrt{E_3E_1}\,/\,E_0\,, \qquad (25)$$

$$b_{23} = -2d\,\exp(i(\beta_2 - \beta_3))\sqrt{E_2E_3}\,/\,E_0\,, b_{32} = -2d\,\exp(i(\beta_3 - \beta_2))\sqrt{E_3E_2}\,/\,E_0\,,$$

где β_j, $j = 1, 2, 3$ — произвольные действительные числа.

Отметим, что формулы (24) и (25) согласуются с формулами (14), если учесть равенство (15).

Случай многоуровневой системы

Выражения (14), (24), (25) и равенство (15) делают естественным предположение, что решение системы (10), удовлетворяющее условиям (9), должно выражаться следующими формулами:

$$s_{jk} = id\left(\delta_{jk} - 2\exp(i(\beta_j - \beta_k))\sqrt{E_jE_k}\,/\,E_0\right),\; E_k = a_k \exp(2c_k dt)\,,$$

$$E_0 = \sum_{k=1}^{n} E_k\,,\; 1 \le j,k \le n\,. \qquad (26)$$

Условие (9) автоматически выполняется, а подстановка выражений (26) в уравнения (10) показывает, что эти уравнения превращаются в тождества. Таким образом, формулы (26) действительно дают общее решение системы (10). А тогда решение уравнения (1) получается по формуле (3), где для элементов матричной функции $S(t)$ справедливы выражения (26). Задача в случае многоуровневой системы решена.

Рассмотрим еще вопрос об инвариантах системы. Из трех инвариантов, указанных в утверждении 1, второй вырождается в силу равенства (9). Расчет третьего инварианта показывает, что $S^{+}S = d^2 I$. Основной интерес представляет первый инвариант

$$D(E) = \det(IE + S)\,.$$

Используя формулы (26), получаем

$$D(E) = \left(\frac{2id}{E_0}\right)^n \det\left(\sqrt{E_jE_k} - \lambda\delta_{jk}\right), \qquad (27)$$

где $\lambda = \dfrac{(E + id)E_0}{2id}$.

Для расчета определителя в формуле (27) воспользуемся следующим утверждением.

Утверждение 2. Для характеристического многочлена матрицы $A = (a_j a_k)$ имеет место формула

$$D_n(\lambda) = \det(A - \lambda I) = (-1)^n \lambda^{n-1}\left(\lambda - \sum_{k=1}^{n} a_k^2\right). \qquad (28)$$

Доказательство. Сначала получим рекуррентное соотношение для многочленов $D_n(\lambda)$. В определителе $D_{n+1}(\lambda)$ из последнего столбца вычтем предпоследний, умноженный на a_{n+1}/a_n. Тогда все элементы $(n+1)$-го столбца, за исключением двух последних, обратятся в 0. Далее разлагая определитель по последнему столбцу, получаем равенство

$$D_{n+1}(\lambda) = -\lambda D_n(\lambda) - \frac{a_{n+1}}{a_n}\lambda B_n(\lambda), \tag{29}$$

где определитель $B_n(\lambda)$ отличается от $D_n(\lambda)$ только последними строкой и столбцом. Элементами последней строки являются произведения $a_j a_{n+1}$, $j = \overline{1,n}$, а элементами последнего столбца $a_k a_n$, $k = \overline{1,n-1}$, $a_{n-1}a_n$. После выноса общих множителей расчет определителя $B_n(\lambda)$ становится возможным; результатом будет выражение $B_n(\lambda) = (-1)^{n-1}\lambda^{n-1}a_n a_{n+1}$. Подставляя его в формулу (29), получаем требуемое рекуррентное соотношение

$$D_{n+1}(\lambda) = -\lambda D_n(\lambda) + (-1)^n \lambda^n a_{n+1}^2. \tag{30}$$

Далее используем метод математической индукции. Формула (28), как легко проверить, верна при $n=1$. Будем считать, что она верна для некоторого $n \in N$. Тогда после подстановки в соотношение (30) получаем

$$D_{n+1}(\lambda) = (-1)^{n+1}\lambda^n\left(\lambda - \sum_{k=1}^{n} a_k^2\right) + (-1)^n \lambda^n a_{n+1}^2 = (-1)^{n+1}\lambda^n\left(\lambda - \sum_{k=1}^{n+1} a_k^2\right).$$

Поскольку результат расчета дает то же самое, что и формула (28) после замены n на $n+1$, то, согласно принципу математической индукции, формула (28) верна для всех натуральных чисел n. Утверждение доказано.

Используя утверждение 2 и формулу (27), можно завершить расчет многочлена $D(E)$. Его результатом будет следующее выражение:

$$D(E) = (E + id)^{n-1}(E - id).$$

Таким образом, характеристическое уравнение имеет два корня. Первый из них $E = id$ — простой, кратность второго $E = -id$ равна $n-1$. Это достаточно неожиданный результат, по-видимому, позволяющий получить новые классы решений матричного уравнения Шредингера и связанных с ним других задач.

Заключение

В работе получены точные решения матричного уравнения Шредингера для многоуровневых квантовых систем и выполнен расчет основных инвариантов. Установлено, что характеристическое уравнение во всех случаях имеет только два корня, из которых один простой, а второй кратный. Специальное внимание уделено случаям двухуровневой и трехуровневой систем.

Список литературы

1. *Зайцев А. А., Каргаполов Д. А.* Новая процедура получения многосолитонных решений уравнения КдВ // Вестник Российского государственного университета им. И. Канта. Вып. 4. Калининград, 2009. С. 21—25.

2. *Зайцев А. А., Каргаполов Д. А.* Конструирование баргмановских гамильтонианов матричного уравнения Шредингера // Там же. 2008. С. 20—25.

3. *Зайцев А. А., Каргаполов Д. А.* О точных решениях матричного уравнения Шредингера // Там же. 2007. С. 16—22.

4. *Зайцев А. А.* Лекции по теории динамических систем: учеб. пособие. Калининград, 2004.

Об авторах

А. А. Зайцев — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., РГУ им. И. Канта.

Д. А. Каргаполов — асп., РГУ им. И. Канта, Dmitry_AK@mail.ru

Authors

A. Zaitsev — Dr., IKSUR.

D. Kargapolov — PhD student, IKSUR, Dmitry_AK@mail.ru